

А.Ю. Янц, П.С. Волегов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет

НЕСИММЕТРИЧНАЯ ФИЗИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ПЛАСТИЧНОСТИ ГЦК-ПОЛИКРИСТАЛЛОВ: ПРОБЛЕМЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СКОРОСТЕЙ СДВИГОВ В СИСТЕМАХ СКОЛЬЖЕНИЯ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ВЯЗКИХ СООТНОШЕНИЙ

Рассмотрены вопросы, связанные с построением физической теории пластичности поликристалла на базе несимметричных мер напряженного и деформированного состояния. Предложена двухуровневая модель упруговязкопластического деформирования поликристаллического агрегата, записан общий вид несимметричного закона упругости в скоростной релаксационной форме. Рассмотрены характерные особенности вязкопластического соотношения для определения скоростей сдвигов, выделен параметр, отвечающий за характер диссипации энергии за счет пластических сдвигов в системах скольжения.

Ключевые слова: физическая теория пластичности, ГЦК, поликристалл, несимметричная упруговязкопластичность, соотношение Хатчисона, вязкий закон.

Введение

В физических теориях пластичности, построенных на основе симметричных мер напряженного и деформированного состояния, существуют проблемы, связанные с неоднозначностью определения активных систем скольжения дислокаций, а также с невыполнением уравнения баланса момента количества движения при рассмотрении процессов, связанных с глубокой перестройкой мезоструктуры поликристаллов. При этом отказываться от учета распределенных поверхностных моментов, приводящих к появлению моментных напряжений, в задачах эволюции микро- и мезоструктуры нельзя, так как это приведет к невозможности физически прозрачно описывать, например, повороты кристаллитов, а следовательно, текстурирование. В работе [3] показано, что использование несимметричных мер напряженного и деформированного состояния для описания НДС на мезоуровне позволяет решить вышеперечисленные проблемы без использования дополнительных гипотез.

Целью работы является построение математической модели неупругого деформирования ГЦК-поликристаллов на базе несимметричной физической теории пластичности, а также оценка влияния параметров вязкопластического соотношения для определения скоростей сдвигов в системах скольжения.

В работах [1–3] предлагается подход к построению многоуровневых моделей (в частном случае – двухуровневых) деформируемого поликристаллического агрегата (ПКА), в частности – общая структура конститутивных моделей с внутренними переменными для описания процессов эволюции микро- и мезоструктуры материала. В рамках данного исследования также будет использоваться двухуровневая модель упругопластического деформирования ПКА; для простоты понимания величины, относящиеся к макроуровню, обозначаются заглавными буквами, родственные параметры, определенные на мезоуровне – теми же строчными. Задается схема деформирования на макроуровне, для деформированного состояния на мезоуровне (зерно, субзерно) принимается модифицированная гипотеза Фойгта для меры скорости деформации. В роли определяющего соотношения на макроуровне используется закон Гука в скоростной релаксационной форме; скорость пластических деформаций определяется из модели второго масштабного уровня (мезоуровня) по скоростям сдвигов по активным системам скольжения, для поиска которых, в свою очередь, используется определяющее соотношение вязкого типа. Предполагается, что процессы деформирования являются квазистатическими и протекают при низких гомологических температурах, что позволяет не учитывать диффузные механизмы (рекристаллизацию, возврат, образование атмосфер примесных атомов (Коттрелла, Сузуки)).

1. Несимметричные меры скорости деформации и напряжения

Для описания процессов деформирования сплошной среды предлагается использовать в качестве меры скорости деформации транспонированный градиент скорости [3]:

$$\xi = \mathbf{v}. \quad (1)$$

Для градиента места используется мультипликативное разложение на обратимую (упругую) и необратимую части: $\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^{in}$. Подставив это соотношение в выражение для ξ , получаем

$$\begin{aligned}
\xi &= (\mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^{in}) \cdot (\mathbf{f}^{in})^{-1} \cdot (\mathbf{f}^e)^{-1} = (\dot{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{f}^{in} + \mathbf{f}^e \cdot \dot{\mathbf{f}}^{in}) (\mathbf{f}^{in})^{-1} (\mathbf{f}^e)^{-1} = \\
&= \dot{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{f}^{in} \cdot (\mathbf{f}^{in})^{-1} \cdot (\mathbf{f}^e)^{-1} + \mathbf{f}^e \cdot \dot{\mathbf{f}}^{in} \cdot (\mathbf{f}^{in})^{-1} \cdot (\mathbf{f}^e)^{-1} = \\
&= \dot{\mathbf{f}}^e \cdot (\mathbf{f}^e)^{-1} + \mathbf{f}^e (\dot{\mathbf{f}}^{in} \cdot (\mathbf{f}^{in})^{-1}) (\mathbf{f}^e)^{-1}.
\end{aligned} \tag{2}$$

Первое слагаемое суммы описывает обратимые деформации среды, второе, вообще говоря, в записанном виде не может быть названо скоростью необратимых деформаций, для этого необходимо перейти к разгруженной конфигурации.

Далее, введем на мезоуровне меру деформированного состояния \mathbf{q} , формально используя определение меры скорости деформации как производной от соответствующей (неголономной) меры деформации:

$$\mathbf{q}^r = \dot{\mathbf{q}} - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{q} + \mathbf{q} \cdot \mathbf{\Omega} = \xi = \mathbf{v}. \tag{3}$$

В качестве спина на мезоуровне предлагается использовать спин решетки $\mathbf{\Omega}$, подробное описание приведено в [3].

2. Несимметричный закон упругости мезоуровня

В классической линейной механике закон упругости получается из разложения в ряд свободной энергии в окрестности нулевых упругих деформаций; с учетом начального ненапряженного и недеформированного состояния в итоге получается соотношение вида

$$\sigma_{ij} = \rho \frac{\partial^2 F}{\partial q_{ij}^e \partial q_{kl}^e} q_{kl}^e = c_{ijkl} q_{kl}^e; \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c} : \mathbf{q}^e, \tag{4}$$

где \mathbf{c} – тензор четвертого ранга, описывающий упругие свойства материала, ρ – плотность, F – свободная энергия Гельмгольца. Из вида (4) можно утверждать симметрию по парам индексов, $c_{ijkl} = c_{klij}$. Утверждать симметрию \mathbf{c} внутри пар индексов нельзя в силу несимметрии на мезоуровне мер напряженного и деформированного состояний.

В [4] показано, что вместе с условием симметрии по парам индексов такой алгоритм позволяет утверждать, что для материала с кубической симметрией решетки тензор упругих свойств \mathbf{c} всего имеет 4 независимых компоненты $-c_{1111}, c_{1122}, c_{1212}, c_{1221}$ (в кристаллографической системе координат).

Тогда на основании вышесказанного несимметричный закон упругости на мезоуровне можно записать в виде

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c} : \mathbf{q}^e, \quad (5)$$

здесь \mathbf{c} – тензор четвертого ранга, имеющий 4 независимые компоненты,

или в скоростной форме:

$$\boldsymbol{\sigma}^r = \mathbf{c} : \boldsymbol{\xi}^e, \quad (6)$$

где $\boldsymbol{\sigma}^r$ – соответствующая коротационная производная мезоуровня, введенная выше и учитывающая вращение кристаллографической системы координат, связанной с решеткой, как жесткого целого. Приведем также закон упругости макроуровня

$$\boldsymbol{\Sigma}^r = \mathbf{C} : (\mathbf{Z} - \mathbf{Z}^{in}), \quad \dot{\boldsymbol{\Sigma}}^r = \dot{\boldsymbol{\Sigma}} - \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{W}, \quad \mathbf{W} = \langle \boldsymbol{\Omega} \rangle, \quad (7)$$

где \mathbf{Z} и \mathbf{Z}^{in} – меры скорости деформации и скорости необратимых деформаций на макроуровне соответственно.

Для решения задачи идентификации вновь появившихся компонент тензора упругих свойств потребовалось поставить и реализовать серию численных экспериментов на простое нагружение, позволивших определить значения всех независимых компонент. В статье [4] при помощи моделирования методом молекулярной статики проводится качественный анализ поведения диаграммы напряжение–деформация для монокристалла при различных отклонениях компонент c_{1212}, c_{1221} тензора упругих характеристик друг от друга. Показано, что даже незначительное расхождение этих компонент тензора упругих свойств существенным образом влияет на поведение представительного объема материала.

3. Некоторые проблемы определения скоростей сдвигов при использовании вязкого закона

В настоящее время в физических теориях пластичности широкое применение получили вязкопластические соотношения для определения скоростей сдвигов вида [5]:

$$\dot{\gamma}_i = \dot{\gamma}_0 H(\tau_i - \tau_{c(i)}) \left| \tau_i / \tau_{c(i)} \right|^{1/m}, \quad \tau_i = \mathbf{b}_i \mathbf{n}_i : \boldsymbol{\sigma}, \quad (8)$$

где τ_i – действующие касательные напряжения в СС, $\mathbf{b}_i \mathbf{n}_i$ – ориентационный тензор СС, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши, действующих в данном зерне, $\tau_{c(i)}$ – критические касательные напряжения в СС, $\dot{\gamma}_0$ – скорость сдвига в СС при достижении критических касательных напряжений, m – параметр скоростной чувствительности материала, от-

вечающий за выраженность вязкого поведения. Соотношения такого вида позволяют избежать многих трудностей при численной реализации по сравнению с упругопластическими моделями, в их числе – неоднозначность выбора активных СС (систем скольжения), которая разрешается различными принципами, например, минимума сдвига, разрешение СЛАУ для определения приращений сдвигов, но при этом в модель вносятся два дополнительных параметра: $\dot{\gamma}_0, m$, точный физический смысл которых до сих пор не ясен. Очевидно, что при $m \rightarrow 0$:

- пропадают все вязкие эффекты, вносимые соотношением (8);
- исчезает необходимость введения функции Хэвисайда;
- скорости сдвигов в СС не могут принимать никаких иных значений, кроме как $\dot{\gamma}_0$ и ноль.

Рассмотрим случай «псевдоодноосного» сжатия, для которого предписанные макродеформации выглядят следующим образом:

$$\mathbf{Z} = \dot{\epsilon} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

где $\dot{\epsilon}$ – скорость деформации, $[\dot{\epsilon}] = c^{-1}$. Однако здесь возникает проблема определения остальных компонент тензора \mathbf{Z} , которая состоит в выполнении условий на свободной поверхности, так как для одноосного НДС нетривиальной должна быть только одна компонента тензора напряжений – из этого условия находятся неизвестные компоненты \mathbf{Z} . Подробное описание реализации данной схемы деформирования представлено в [6].

При исследовании поведения результатов моделирования при различных параметрах $\dot{\gamma}_0, \mathbf{Z}, m$ оказалось, что решающее значение для предела текучести и эволюции скоростей сдвигов в СС имеет отношение параметров $\dot{\gamma}_0$ и $\dot{\epsilon}$. Ниже, на рис. 1, 2, приведены зависимости скоростей сдвигов от накопленной деформации для отдельного зерна при изменении $\dot{\gamma}_0$ для фиксированной скорости деформации $\dot{\epsilon}$. Отметим, что на характерные особенности этих зависимостей не влияют схема деформирования и ориентация зерна относительно лабораторной системы координат (ЛСК). Аналогичные результаты получаются при варьировании $\dot{\epsilon}$ при фиксированном $\dot{\gamma}_0$. Приведем параметры модели,

которые являются фиксированными во всех приведенных численных экспериментах:

$$\begin{aligned} \tau_{c(i)} &= 17,5 \text{ МПа}, \quad i = 1, 2, 4; & C_{1111} &= 168,4 \text{ ГПа}; \\ \dot{\epsilon} &= 10^{-5}; & C_{1122} &= 121,4 \text{ ГПа}; \\ dt &= 0,1; & C_{1212} = C_{1221} &= 75,4 \text{ ГПа}; \\ \psi &= 1,0002; & \alpha &= 0,05. \end{aligned}$$

Из рис. 2 видно, что скорости сдвигов, которые имели значение ниже $\dot{\gamma}_0 = 10^{-5}$ при $\dot{\gamma}_0 = 10^{-6}$ (см. рис. 1), теперь реализуются со значением $\dot{\gamma}_0 = 10^{-5}$, но это происходит скачкообразно, т.е. данные системы скольжения в части процесса не активны, а другой части активны со скоростью сдвига в них $\dot{\gamma}_0 = 10^{-5}$ (условно назовем это периодами активности и неактивности). Это связано с тем, что предписанные скорости деформаций меньше возможных реализуемых. С одной стороны, скорости сдвига в некоторых СС, необходимые для релаксации закачиваемой энергии, должны быть меньше $\dot{\gamma}_0$, с другой стороны, введение функции Хэвисайда ограничивает снизу возможные скорости деформирования значением $\dot{\gamma}_0$. Периоды активности и неактивности длятся порядка нескольких итераций численного счета, при этом чем больше $\dot{\gamma}_0$, тем меньше эти периоды. Аналогичная ситуация наблюдается при дальнейшем увеличении $\dot{\gamma}_0$, т.е. при некотором значении данного параметра скорости сдвига во всех активных СС принимают одно значение – $\dot{\gamma}_0$. При уменьшении $\dot{\gamma}_0$ (аналогично при увеличении $\dot{\epsilon}$) получаем ситуацию, когда скоростей сдвигов, реализуемых в СС при данном значении $\dot{\gamma}_0$, недостаточно для реализации предписанных деформаций, что компенсируется повышением действующих касательных напряжений в СС (общих напряжений в зерне). Из вышесказанного следует, что решающее влияние оказывают не конкретные значения $\dot{\gamma}_0$ и $\dot{\epsilon}$, а их соотношение, поэтому введем некоторый безразмерный параметр, связывающий $\dot{\gamma}_0$ и $\dot{\epsilon}$: $\dot{\gamma}_0 = \mu \dot{\epsilon}$, тогда

$$\dot{\gamma}_i = \mu \dot{\epsilon} H(\tau_i - \tau_{c(i)}) \left| \tau_i / \tau_{c(i)} \right|^{1/m},$$

где μ – безразмерный вязкий параметр, которому можно приписать физический смысл скорости релаксации энергии пластическими сдви-

гами. Ниже будет показано, что он влияет на сам характер релаксации энергии.



Рис. 1. Скорости сдвигов в зерне при $\dot{\gamma}_0 = 10^{-6}$, $\dot{\epsilon} = 10^{-5}$

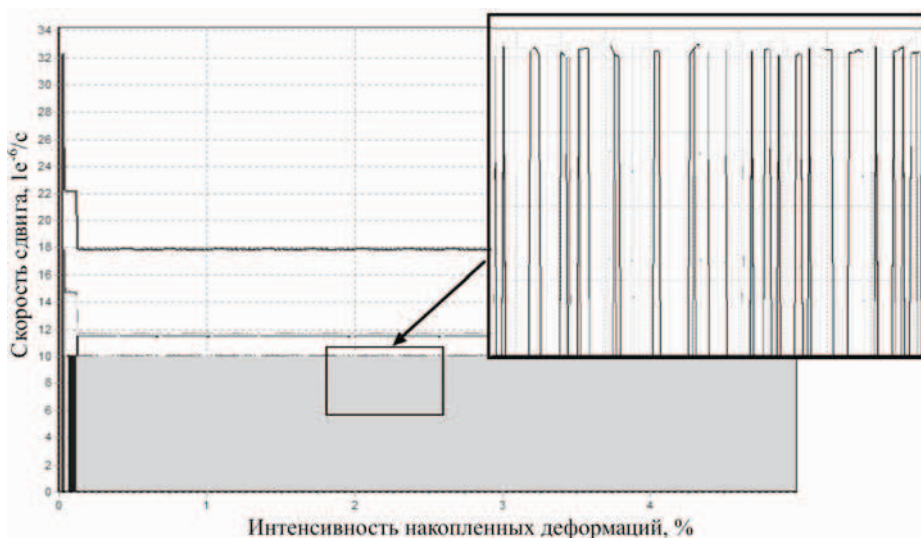


Рис. 2. Скорости сдвигов в зерне при $\dot{\gamma}_0 = 10^{-5}$, $\dot{\epsilon} = 10^{-5}$

На рис. 3 изображены зависимости предела текучести от параметра μ при различных значениях чувствительности m ; заметно, что

предел текучести не зависит от параметра m при $\lg \mu > 0$, а также, что при $\lg \mu < 0$ существует линейная связь предела текучести от $\lg \mu$. При фиксированном μ предел текучести пропорционален m , это связано с тем, что при больших m скорость сдвига в активной СС меньше, но при этом активируется больше СС, чем при меньших m , так как достигаются более высокие напряжения.

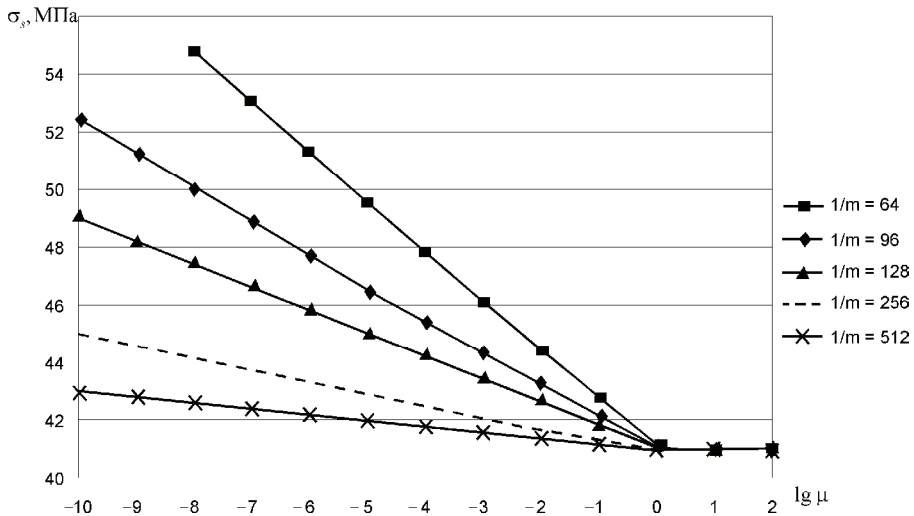


Рис. 3. Зависимость предела текучести от параметра μ при различных значениях параметра скорости чувствительности m

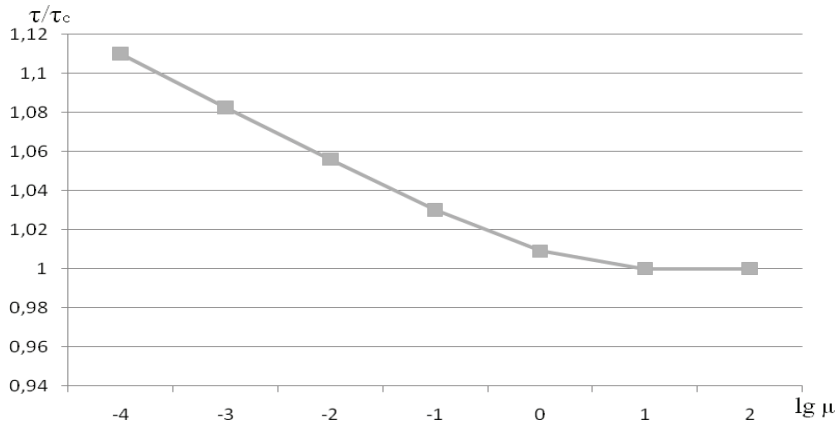


Рис. 4. Зависимость относительного отклонения действующих касательных напряжений в СС от параметра μ

На рис. 4 представлена зависимость отклонения действующих касательных напряжений τ от критических τ_c при различных значениях μ . Из рис. 4 следует, что при увеличении μ отклонение действующих ка-

сательных напряжений от критических уменьшается, т.е. в некотором смысле мы приближаемся к упругопластическим моделям, т.е. действующие касательные напряжения τ в активных СС не могут принимать других значений, кроме критических τ_c .

Приведенные ниже графики численных расчетов приводятся для значения $m = 1/96$. В качестве закона упрочнения использовалось соотношение [7]

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \psi \left(\sum_{i=1}^{24} a_i^{(k)} \frac{(\gamma^{(i)})^{\psi-1}}{\sum_{i=1}^{24} \gamma^{(i)}} \gamma^{(i)} \right), \quad k = \overline{1, 24}, \quad \psi > 1, \quad \gamma^{(i)} \geq 0, \quad (9)$$

где $a_i^{(k)}$ – матрица модулей упрочнения, $a_i^i = \alpha E$, $a_k^i = 0,8\alpha E$, E – модуль Юнга.

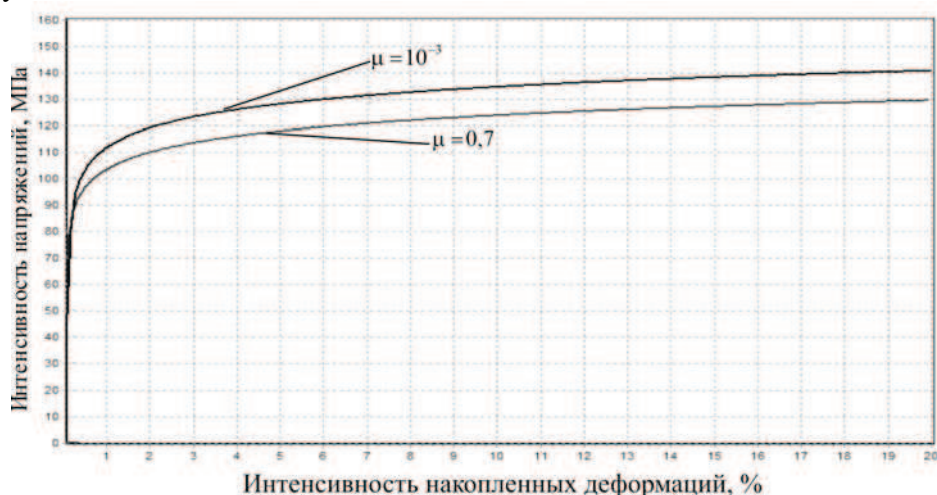


Рис. 5. Диаграммы напряжение–деформация при использовании основного закона упрочнения вида (9) при различных значениях μ

На рис. 5 показаны две зависимости интенсивности напряжений от интенсивности деформаций при различных значениях параметра μ , откуда видно, что упрочнение происходит интенсивней при меньших значениях μ , хотя характер упрочнения остается неизменным, так как все отличие заключается в разности пределов текучести (см. рис. 3).

На рис. 6, 7 приведены расчеты для ПКА с законом упрочнения вида (9). Скачкообразное изменение напряжений вызвано тем, что минимально возможная скорость сдвига $\dot{\gamma}_0$ превосходит необходимую

для реализации предписанных деформаций в некоторых СС. В связи с этим данные СС часть процесса являются активными, другую часть – не активными. Из приведенных рисунков видно, что при меньших μ средняя скорость сдвига значительно меньше (принимает одинаковые значение при $\lg \mu < 0$). Аналогичным образом объясняются скачки на диаграмме для среднего количества активных СС. Также отметим, что суммарная скорость сдвига по всем СС не зависит от μ , то есть скорость релаксации закачиваемой энергии неизменна при одной скорости

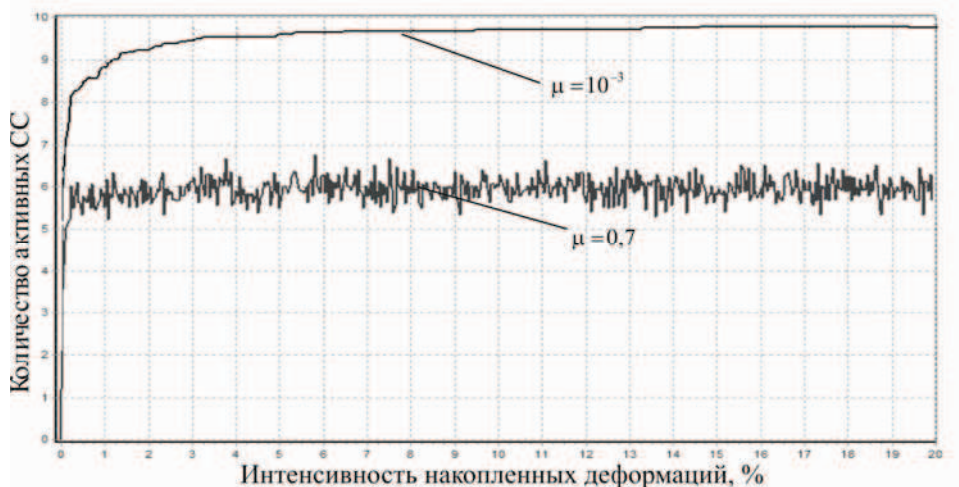


Рис. 6. Диаграммы среднего количества активных СС по всему ПКА от накопленных деформаций при использовании основного закона упрочнения вида (9)

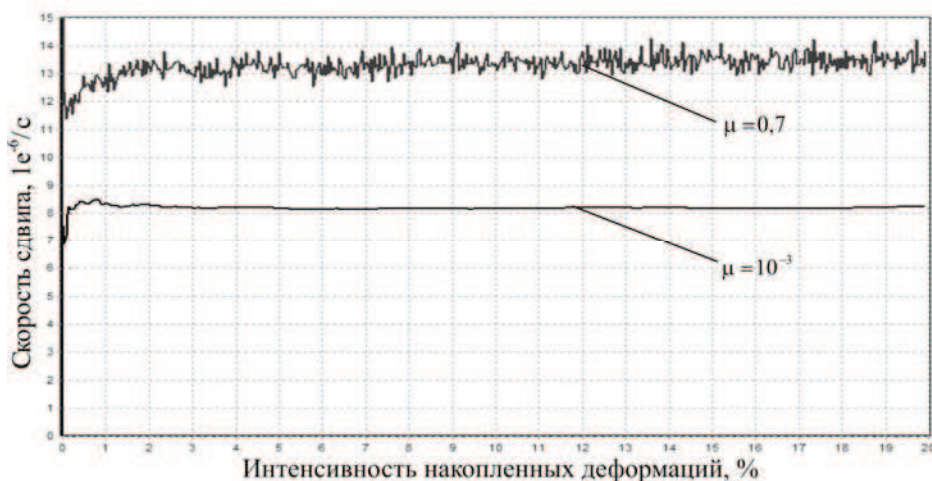


Рис. 7. Диаграммы средней скорости сдвига в активных СС по всему ПКА от накопленных деформаций при использовании основного закона упрочнения вида (9)

деформации, что, очевидно, соответствует закону сохранения энергии. Однако наблюдается изменение способа релаксации – происходит перераспределение скоростей сдвигов по СС, то есть при $\lg \mu > 0$ количество СС, по которым течет материал, меньше, чем при $\lg \mu < 0$. При меньших значениях вязкостного параметра ($\lg \mu < 0$) задействовано больше систем скольжения (степеней свободы), что происходит за счет более высоких напряжений, чем в случае $\lg \mu > 0$.

Заключение

Таким образом, в статье рассмотрены вопросы, связанные с построением физической теории пластичности поликристалла на базе несимметричных мер напряженного и деформированного состояния. Предложена двухуровневая модель упруговязкопластического деформирования поликристаллического агрегата, записан общий вид несимметричного закона упругости в скоростной релаксационной форме. Рассмотрено вязкое соотношение для определения скоростей сдвигов в СС, выделен параметр μ , связывающий скорость деформирования и скорость сдвига в СС при достижении критического касательного напряжения, выявлены характерные зависимости от данного параметра характеристик напряженно-деформированного состояния. Показано, что характер диссипации энергии пластическими сдвигами зависит от значения μ , точнее: при $\lg \mu > 0$ сдвиговое скольжение характеризуется меньшим набором активных систем скольжения и большими скоростями сдвигов, при $\lg \mu < 0$ – большим количеством активных СС и меньших скоростей сдвигов в них. Также показано, что суммарный сдвиг по всем СС не зависит от данного параметра, а зависит от скорости деформирования. Выявлена обратная зависимость предела текучести от μ , однако при значениях $\lg \mu > 0$ предел текучести одинаковых и модель по своей сути становится упругопластической.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 10-08-96010-р_урал_a, 10-08-00156-а).

Библиографический список

1. Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры / П.В. Трусов, В.Н. Ашихмин, П.С. Волегов, А.И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т. 12, № 3. – С. 61–72.

2. Трусов П.В., Волегов П.С. Определяющие соотношения с внутренними переменными и их применение для описания упрочнения в монокристаллах // Физическая мезомеханика. – Томск, 2009. – Т.12, № 5. – С. 65–72.

3. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Несимметричная физическая теория пластичности для описания эволюции микроструктуры поликристаллов // Физическая мезомеханика. – Томск, 2011. – Т.14, № 1 – С. 19–31.

4. Волегов П.С., Шулепов А.В. Упругие константы монокристалла в несимметричной физической теории пластичности // Вестник ПГТУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2010. – № 1. – С. 19–34.

5. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 2004. – Vol. 193. – P. 5359–5383.

6. Волегов П.С., Янц А.Ю. Несимметричная физическая теория пластичности ГЦК-поликристаллов: особенности реализации некоторых схем деформирования // Вестник ПГТУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2011. – № 1. – С. 121–137.

7. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Описание внутризеренного и зернограничного упрочнения моно- и поликристаллов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – СПб., 2010. – № 2(98). – С. 110–119.

Получено 02.07.2011

A.Yu. Janz, P.S. Volegov

The Perm national research polytechnic university

ASYMMETRIC CRYSTAL PLASTICITY THEORY FOR F.C.C POLYCRYSTALS: PROBLEM OF DETERMINING THE SHEAR RATES IN SLIP SYSTEMS USING VISCOUS RELATIONS

The questions connected with the construction of a polycrystals crystal plasticity theory on the basis of asymmetric measures of stress and strain state are discussed. Two-level elastoviscoplastic model of polycrystalline aggregate and the general form of asymmetric elasticity law in the form of speed relaxation form are proposed. The characteristic features of viscoplastic relations for determining the shear rates are considered, parameter which response for the describing the energy dissipation due to plastic shear in the slip systems is selected.

Ключевые слова: crystal plasticity, f.c.c., polycrystal, asymmetric elastoviscoplasticity, соотношение Hutchison's law, viscous law.